ENS Cachan - UPMC

Mécanique Quantique

TD n°2 : Ondes de matière

Exercice 1: L'incontournable paquet d'onde Gaussien

On considère un paquet d'onde évoluant en l'absence de potentiel dans un espace unidimensionnel. Sa forme à l'instant initial est donné par une gaussienne

$$\psi(x,t=0)=\frac{1}{\sqrt{a}\pi^{1/4}}\exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)$$

1. Représenter l'allure de la densité de probabilité de présence.
2. Calculer la fonction d'onde en impulsion $\widetilde{\psi}(p,t=0)$ ("représentation en p").
3. Calculer les valeurs moyennes des observables suivantes x, p, x^2, p^2. En déduire l'expression du produit des écarts-types en position et impulsion: $\Delta x \Delta p$.
4. Donner l'expression de $\widetilde{\psi}(p,t)$. En déduire la valeur moyenne des observables p et p^2.
5. Calculer $\psi(x,t)$ à partir de l'expression de $\widetilde{\psi}(p,t)$.
6. En déduire l'expression du produit des incertitudes $\Delta p(t)\Delta x(t)$. Commenter les résultats obtenus.
7. On considère la fonction d'onde en "représentation-p"

   $$\underline{\widetilde{\psi}}(p,t=0)=\widetilde{\psi}(p-p_0,t=0)$$

   Que représente p_0 ?
8. En utilisant uniquement l'intégrale de Fourier exprimer $\underline{\psi}(x,t)$ en terme de la fonction d'onde $\psi(x,t)$.
9. En quoi les incertitudes en position et impulsion pour ce système diffèrent des expressions précédentes ?

<u>**Remarque**</u>: On donne le résultat de l'intégrale gaussienne: $\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-\alpha(x+\beta)^2)dx=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$ α,β pouvant être complexes et α ayant un argument compris entre $[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}]$.

Exercice 2: Interférences atomiques

On considère deux paquets d'ondes gaussiens nettement séparés à l'instant initial et se propageant l'un vers l'autre. Les deux paquets d'ondes représentent chacun le mouvement du centre de masse d'un atome. Dans ce modèle extrêmement simplifié, on néglige les interactions entre les deux atomes[1]. La fonction d'onde à l'instant initial est de la forme

$$\Psi(x,t=0)=\mathcal{N}(t=0)\left[\exp\left(-\frac{(x+b)^2}{2a^2}\right)\exp\left(\frac{ip_0x}{\hbar}\right)+\exp\left(-\frac{(x-b)^2}{2a^2}\right)\exp\left(\frac{-ip_0x}{\hbar}\right)\right]$$

[1]On suppose aussi que les atomes sont discernables (par exemple, états internes différents). Cette remarque prendra sens dans la suite du cours.

1. Que représentent les quantités a, b et p_0 ?

2. En reprenant les résultats de l'exercice précédent sur le paquet d'onde gaussien, donner les expressions de la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ et de la densité probabilité associée $\rho(x, t)$.

3. On choisit comme valeurs des paramètres: $b = 4\pi a$ et $p_0 = \dfrac{2\pi\hbar}{a}$. Tracer l'allure de $\rho(x, t = 0)$.

4. A quel instant (noté t_1) les centres des paquets d'ondes coïncident-ils ?

5. Montrer que lorsque les centres des deux paquets d'ondes coïncident, le système est le siège d'interférences (matière + matière $\rightarrow$ absence de matière !) . Calculer l'interfrange correspondant.

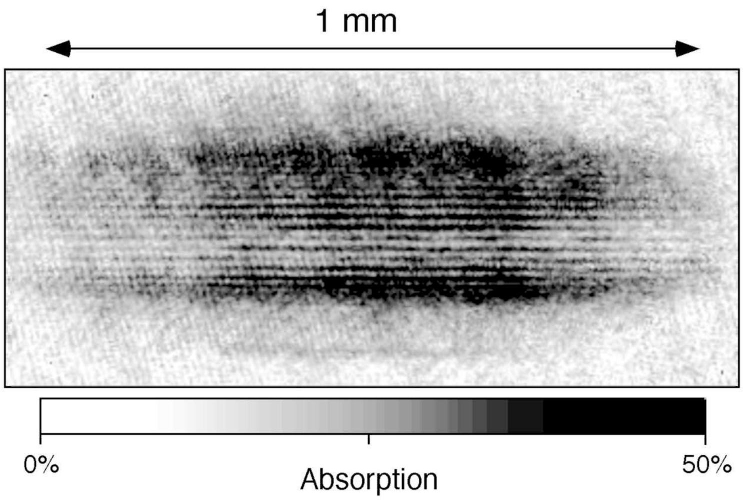


Figure 1: Interférences obtenues avec des ondes de matière. Ces expériences ont été réalisées en 1996 par le groupe de Wolfgang Ketterle avec des condensats de Bose. Les atomes (dont le nombre est de l'ordre de 10^5) occupent en grande partie le même état quantique.

6. Calculer la densité de probabilité maximum ρ_{max}. Combien y-a-t-il de maxima dans l'intervalle de positions tel que $\rho > (\rho_{max}/e^2)$. Tracer l'allure de $\rho(x, t_1)$.

Exercice 3: Diffraction de Bragg

On considère la diffraction d'un faisceau d'électrons de basse énergie par un réseau cristallin (Figure 2).

L'onde est diffractée par les nuages électroniques des atomes de la surface du cristal. Pour simplifier on suppose que les centres diffuseurs sont ponctuels.

1. On note V, l'énergie cinétique des électrons dans le faisceau. Pour quelles valeurs de θ y-a-t-il interférences constructives (maximum d'intensité reçue dans le détecteur).

2. On fait varier V de 30 eV à 500 ev pour une valeur de a de 0.2 nm. Quelle est la plage de variation de l'angle θ ?

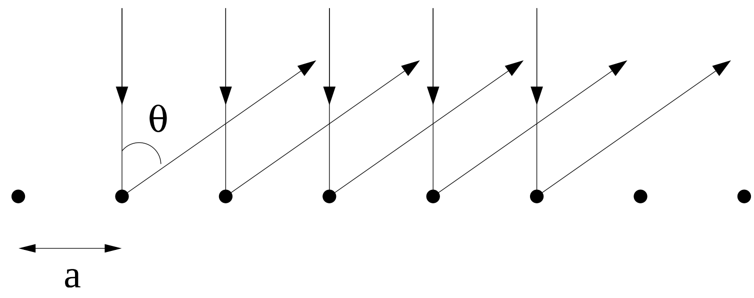
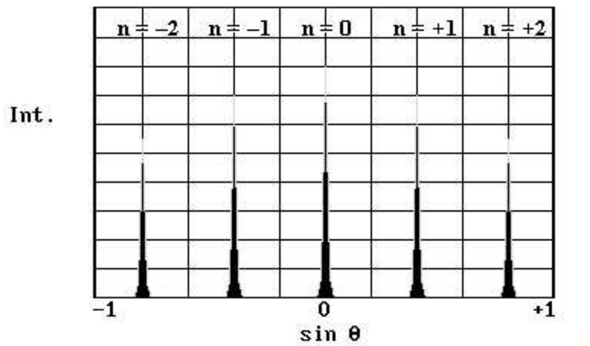


Figure 2: Schématisation des rayons servant au calcul de la diffraction

3. Pour une énergie de 100 eV, la variation de l'intensité du faisceau difracté en fonction de θ a l'allure suivante:



Quelle est la valeur de a ?

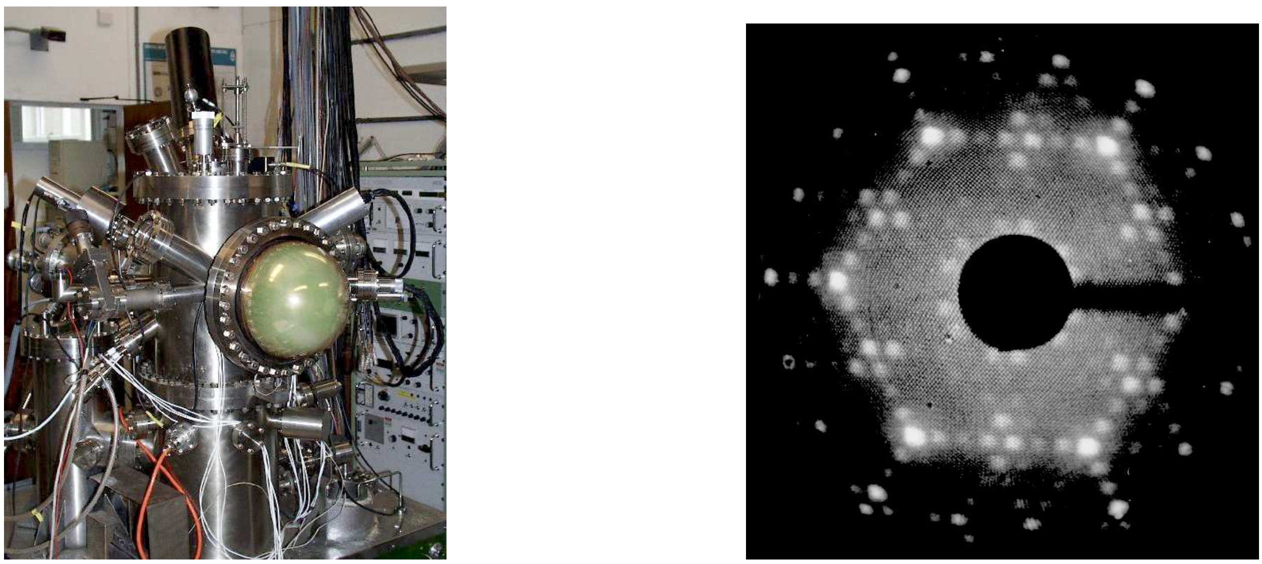


Figure 3: A gauche, appareil servant à caractériser des surfaces cristallines par diffraction électronique. A droite, figure de diffraction obtenue avec un échantillon de Silicium.

Exercice 4: Effet tunnel et états de diffusion

On considère dans un problème unidimensionnel, le potentiel suivant

$$V(x) = \begin{cases} U_0 & \text{pour } |x| < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{pour } |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases} .$$

On pose dans la suite $U_0 = \dfrac{\hbar^2}{2m}K^2 > 0$. On numérote les trois régions de l'espace $]-\infty, -\frac{a}{2}]$, $[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$ et $[\frac{a}{2}, \infty[$ respectivement 1,2 et 3.

1. **Coefficients de réflexion et de transmission**

   (a) Représenter graphiquement le potentiel.

   (b) Ecrire la fonction d'onde d'énergie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ en terme des ondes se propageant vers les x croissants et vers les x décroissants d'amplitudes respectives A_i^+ et A_i^- (i=1,2,3). On posera dans la suite $q^2 = k^2 - K^2$.

   (c) Calculer les courants de probabilités dans les trois régions d'espace en fonction des $A_i^\pm$.

   (d) On étudie le cas où l'onde entrante vient de $-\infty$. Etablir le système d'équations vérifiées par les amplitudes $A_i^\pm$.

   (e) Calculer les coefficients de réflexion (r) et transmission (t) associés aux amplitudes pour l'ensemble de la barrière.

   (f) Montrer d'une manière générale que les coefficients de transmission et de réflexion définis par $T = |t|^2$ et $R = |r|^2$ vérifient $R + T = 1$. Vérifier cette égalité pour la situation étudiée ici.

2. **Résonances**

   Calculer le coefficient de transmission $T = |t|^2$ dans le cas où $E > U_0$ et le mettre sous la forme

   $$T(\Phi) = \frac{1}{1 + A^2 \sin^2(\Phi)} \quad \text{avec } \Phi = qa,$$

   avec A une fonction de k et q à déterminer. Montrer que $T(\Phi)$ possède des résonances. Donner leurs positions et largeurs. On pourra éventuellement mener le calcul en terme de réflexions multiples en analogie avec l'optique.

3. **Effet tunnel**

   (a) Dans cette partie $0 < E < U_0$. Calculer explicitement $t(a)$ et $T(a) = |t(a)|^2$. Quel est l'analogue optique de ce phénomène ?

   (b) On considère une double hétérofonction de semi-conducteurs $G_a A_s / G_{a_{1-x}} Al_x A_s$ avec les paramètres suivants

   - masse effective de l'électron égale à 0.067 m_e
   - $U_0 \simeq 375$ meV pour $x = 0{,}3$
   - largeur de la barrière entre 1 et 10 nm

   Quelle est la probabilité de passage pour un électron d'énergie cinétique $E = 40$ meV ?